



TITLE:

ナノ炭素細線物質に関する理論計算

AUTHOR(S):

中江, 隆博

CITATION:

中江, 隆博. ナノ炭素細線物質に関する理論計算. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 33-33

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230733>

RIGHT:

ナノ炭素細線物質に関する理論計算
Theoretical studies on carbon nano-wire materials

京都大学エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門
分子ナノ工学研究分野 中江隆博

ナノ炭素細線物質であるグラフェンナノリボン(GNR)は、分子幅・炭素骨格に依存した物性を有し、優れた電子・磁気特性を示す次世代型の高機能材料として期待されている。極細分子幅・エッジ構造を制御して GNR を作り分ける合成法として、我々は 2 ゾーン気相成長法(2Z-CVD 法)を開発した。2Z-CVD 法により GNR を高効率合成することでボトムアップ型 GNR 薄膜の単離が可能となり、実験的な物性計測に成功している。

今回、アームチェア型 GNR の多層構造について低温 STM 観察により詳細な配項構造を明らかにした。[1] 低温 STM 観察において、分子幅の異なる 5-AGNR と 7-AGNR の最上層について、幅のせまい 5-AGNR では通常予期される face-on 配向を取っていたが、一方で幅の広い 7-AGNR において Edge-on 配向が観察された。多層 GNR の配向の違いに関して、計算機シミュレーションにより考察を行った。計算手法は Materials Studio 2016 DFTB+モジュールを用いて Au(111)面上の face-on GNR および、face-on GNR 上に face-on または edge-on 配向した GNR のエネルギーを計算し、生成エネルギーの差分をセル内の GNR 分子で規格化することで、相対安定化エネルギーを求めた。その結果、5-AGNR では GNR 上に face-on 配向が有利であることに対し、7-AGNR では GNR 上では edge-on 配向が有利であることが明らかとなり、実験結果を支持した。

また、ばね状の有機分子が分子歪みを駆動力とする新しい形式の骨格変換反応を見出し、分子の平面化エネルギーが駆動力であることを示した。[2]

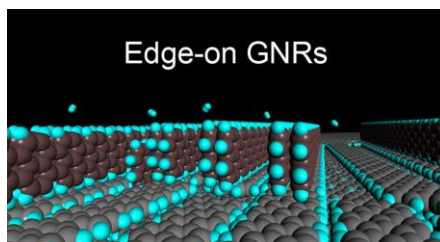


Figure 1. Orientation of multi-layered 7-AGNR.

発表論文(謝辞あり)

- [1] T. Kojima, Y. Bao, C. Zhang, S. Liu, H. Xu, T. Nakae, K. P. Loh, H. Sakaguchi, Langmuir 2017, 33(40), 10439-10445.
- [2] A. Shiotari., T. Nakae, K. Iwata, S. Mori, T. Okujima, H. Uno, H. Sakaguchi, Y. Sugimoto Nat. Commun. 2017, 8, 16089.